混合失配模型预测金属/半导体界面热导

宗志成[1)] 潘东楷[1)] 邓世琛[1)] 万骁[1)] 杨哩娜[2)] 马登科[3)] 杨诺[1)†]

1)（华中科技大学能源与动力工程学院，武汉 430074）

2)（北京理工大学宇航学院，北京 100081）

3)（南京师范大学物理科学与技术学院，南京 210000）

摘 要

声学失配模型和漫散射失配模型被广泛应用于界面热导的计算，两种模型分别建立在极端光滑和粗糙界面的假设基础上。由于实际界面结构与两种假设的区别较大，造成两种模型预测结果与实际界面热导偏差较大。近期提出的混合失配模型考虑了界面结构对声子镜面透射和漫散射透射比例的影响，预测的准确度有所提高。但该模型需要通过分子动力学模拟获取界面声子信息较为复杂。为此，本文通过引入测量的粗糙度数值简化混合失配模型，并增加考虑界面结构对接触面积的影响，实现对界面热导简单快捷、准确地预测。基于该模型，本文计算预测了金属（铝、铜、金）和半导体（硅、碳化硅、砷化镓、氮化镓)的界面热导。并将铝/硅界面的结果与实验测量结果对比，数据吻合较好。该模型不仅有助于界面导热机理的理解，而且利于与测量结果对比。

关键词：界面热导，界面热阻，金属/半导体界面，声学失配模型，漫散射失配模型

PACS：63.20.D-, 63.20.kg, 68.35.-p, 44.10.+i

† 通信作者. E-mail: nuo@hust.edu.cn

第一作者. E-mail: zhicheng@hust.edu.cn

1 引 言

现代电子器件尺寸的逐渐减小和功率密度的迅速增大，使得散热已成为器件性能和可靠性的最重要挑战之一[1-5]。特别是在包含高密度界面结构的纳米器件和结构中，其特征尺寸已缩小到能量载流子平均自由程的量级，原子尺度界面热阻已经无法被忽视[6-10]，频率更高、密度更大的微电子器件散热问题对增大界面热导的需求更为迫切[11, 12]。深入理解金属/半导体界面的热输运对于热科学的基础和工程应用如半导体器件的热管

理都是至关重要的。

近年来，界面热输运成为学术界和工业界的研究热点[13]。Deng 等[4]人用漫散射失配模型预测了 SiC/SiO_2 和 Si/SiO_2 的界面热导，其预测值与 3-omega 实验的测量结果非常吻合。Yang[10]采用了分子动力学（Molecular dynamics, MD）模拟了 Al/Si 界面的热输运，并发现界面处原子的无序程度是影响界面声子运输的一个重要方面。随后，Yang 等[7]人通过非平衡格林函数（Non-equilibrium Green function, NEGF）方法和机器学习算法研究了一维原子链中间层质量分布对界面热导的影响，计算了界面热导极值对应的质量分布。纳米尺度下界面热输运极大依赖于界面结构[13]，实验发现，界面热阻和以下几种因素有关：粗糙度[14-17]、界面缺陷[16, 18, 19]和生长方法[20-22]等等。

作为经典的界面热输运理论模型，由于其简单易用，声学失配模型（Acoustic mismatch model, AMM）和漫散射失配模型（Diffuse mismatch model, DMM）被广泛应用于界面热导的预测。然而 AMM 和 DMM 分别建立在极端光滑和粗糙界面的假设基础上，没有考虑具体界面结构，其预测结果与实际界面热导有较大偏差。Zhang 等[23]人提出了混合失配模型（Modified mismatch model, MMM），考虑界面粗糙度及其对声子镜面透射和漫散射透射比例的影响，对界面热导预测更准确，但其需要借助 MD 模拟获取界面声子信息，其复杂性限制被更广泛使用。

本文提出利用实验测量得到的粗糙度数值，简化混合失配模型，从而更方便快捷地对界面热导进行预测。首先，根据晶格动力学和第一性原理计算了金属（铝、铜、金）和半导体（硅、碳化硅、砷化镓、氮化镓）的声子热输运参数。随后，基于简化的混合失配模型，本文计算预测了金属（铝、铜、金）和半导体（硅、碳化硅、砷化镓、氮化镓）的界面声子透射率和界面热导。并将铝/硅界面热导的计算结果与实验测量结果对比，计算准确度得到验证。

2 理论与方法

对于金属/半导体界面，热的载流子包括声子和电子[24]。针对电子贡献率的问题，研究人员们开展了诸多工作，如 Singh 等[25]基于 Bloch-Boltzmann-Peierls 公式的研究发现电子-声子耦合对界面热输运的贡献可以忽略；Hamaoui 等[26]人通过频域光热辐射法研究发现，对于金属/硅界面在高于 150K 时界面热输运主要由声子主导；Giri 等[27]人则通过时域热反射测量法研究发现，对于金属/半导体界面，只有当电子和声子之间处于高度非平衡的条件下，界面上的电子-声子散射才会对界面热导有贡献。因此，电子-声子耦合对固-固界面热导的重要性仍存在争议[28]。当处于平衡条件下时，在金属/非金属界面中电子对界面热导的贡献大多被认为可以忽略[13]。因此在本文中仅考虑了声子对界面热导的贡献。

当入射声子到达材料 A 和 B 的固-固界面时，根据 Landauer 理论，界面热导可以通过公式（1）进行预测：

$$G_{\mathrm{m}}=\frac{1}{4}\sum_{j}\int_{0}^{\omega_A^{\max}} D_A(\omega)\frac{\partial n(\omega,T)}{\partial T}v_{A,j}\alpha_{A\to B}(\omega)d\omega \tag{1}$$

其中，ω 为频率，ω_A^{max}为材料 A 的声子色散关系截止频率，D_A 为声子态密度（Density of states, DOS），n（ω,T）为玻色-爱因斯坦分布函数，v 为声子群速度，$\alpha_{A\to B}$ 为界面处声子透射系数，下标 j 表示不同的声子模式。由公式（1）可知，只需得到界面两侧材料的声子热输运参数和界面处的声子透射率 $\alpha_{A\to B}$，即可得到理论界面热导 G_m。在本文中，声子热输运参数主要通过晶格动力学和第一性原理进行计算，而界面处的声子透射率将采用理论模型进行计算。

AMM 和 DMM 模型作为经典的界面声子输运模型，其计算公式如下[29]：

$$\alpha_{AMM,\,A\to B}=\frac{4\rho_A v_A \rho_B v_B}{\left(\rho_A v_A+\rho_B v_B\right)^2} \tag{2}$$

$$\alpha_{DMM,\,A\to B}=\frac{\sum_j D_B v_{B,\,j}}{\sum_j D_A v_{A,\,j}+\sum_j D_B v_{B,\,j}} \tag{3}$$

AMM 模型假设界面仅发生透射和反射，而 DMM 模型假设界面处发生漫散射，然而在实际情况中的固-固界面处，声子会同时发生透射、反射和漫散射[30, 31]。因此，MMM 模型中用一个假设的镜面参数 p 来表示声子在界面上的镜面透射比例，则声子漫散射的比例为（1-p），此时的声子透射率通过 AMM 和 DMM 的线性组合来定义[23]：

$$\alpha_{MMM,\,A\to B}=p\cdot\alpha_{AMM,\,A\to B}+\left(1-p\right)\cdot\alpha_{DMM,\,A\to B} \tag{4}$$

Ziman 等[32]曾指出镜面参数 p 与均方根粗糙度 η 和声子波长 λ 有关，并将这种关系定义为：

$$p=\exp\left(-\frac{16\pi^2\eta^2}{\lambda^2}\right) \tag{5}$$

公式（5）的关键是界面处的粗糙度 η 的获得，Zhang 等[23]采用 MD 模拟了 Al/Si 界面，并采用 DOS 来表征 η 的大小，但 MD 复杂的建模与模拟时间使得 MMM 模型的使用极为复杂。因此，本文使用先前研究人员测量得到的粗糙度 η 代入公式（5）中得到镜面参数 p，进而可以简便使用 MMM 模型计算界面热导，并与实验测量的结果进行对比验证。

此外，在实际情况中界面处材料间接触通常存在孔隙、不是理想的完美接触，因此实际接触面积将变小影响导热。为了界面热导预测中增加孔隙对接触面积的影响，本文引入修正接触面积的参数 S（界面接触系数）。当界面处完美无孔隙时，S=1；对于实际情况，界面处存在孔隙时，S<1。实际情况下的界面热导 G 可以表示为：

$$G=S\cdot G_{\mathrm{m}} \tag{6}$$

其中，G_{m} 是理论模型计算得到的界面热导值，S为界面接触系数，当界面处无孔隙时，S=1，当界面处存在孔隙时，S<1。

3 结果和讨论

金属（Al、Cu、Au）和半导体（Si、SiC）的色散关系及 DOS 使用晶格动力学软件 GULP[33]计算，其中 Al 采用 Mei-Davenport[34]势函数，Cu 和 Au 使用 EAM[35, 36]势函数，Si 使用 SW[37]势函数，SiC 使用 Tersoff[38]势函数。GaAs 和 GaN 的色散关系及 DOS 使用 VASP 结合 phonopy 计算。以上 3 种金属和 4 种半导体材料的声子色散关系及 DOS 如图 1 和图 2 所示。

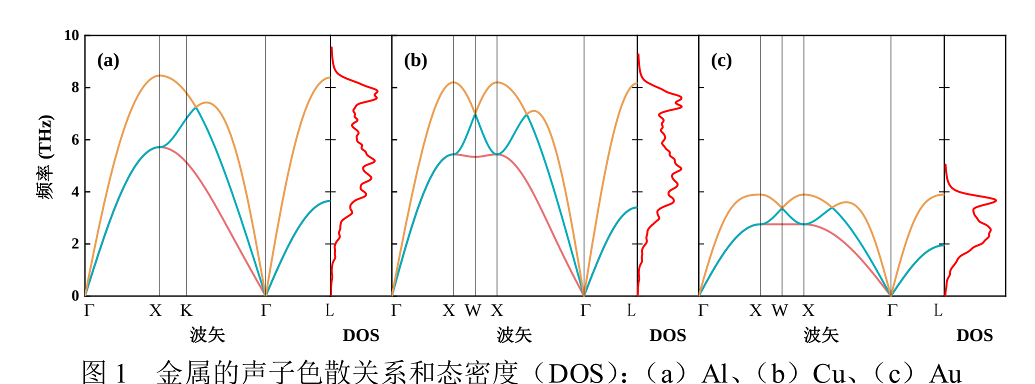


图 1　金属的声子色散关系和态密度（DOS）：（a）Al、（b）Cu、（c）Au

Fig. 1.Phonon dispersion relations and density of states (DOS) of metals: (a) Al, (b) Cu, (c) Au.

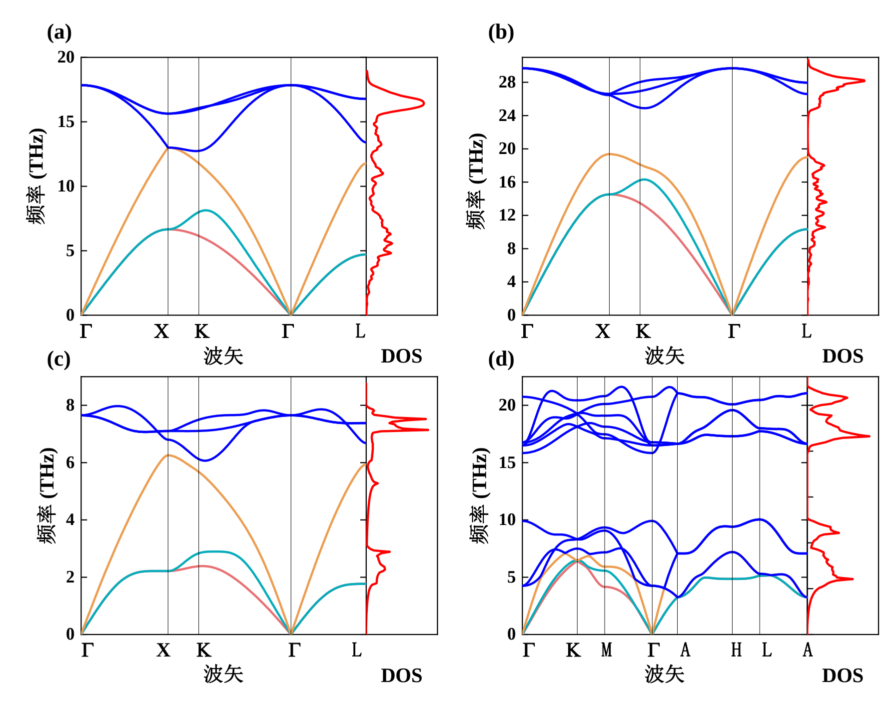


图 2　半导体的声子色散关系和态密度（DOS）：（a）Si；（b）SiC；（c）GaAs；（d）GaN

Fig. 2.Phonon dispersion relations and density of states (DOS) of semiconductors: (a) Si;(b) SiC;(c) GaAs;(d) GaN.

图 1 和图 2 中红色的曲线代表的是 DOS，并进行了归一化处理。金属（Al、Cu、Au）均为面心立方结构，原胞中仅有一个原子，因此色散关系曲线中仅有声学支，截止频率由大到小依次为：Al（8.4THz）、Cu（8.1THz）、Au（3.8THz）。对于半导体材料，原胞中不止一个原子，因此色散关系曲线中除了声学支还有光学支的存在。由于在理论模型中，界面仅考虑相同声子模式 j 间的作用，因此对于半导体材料同样仅考虑声学支对界面热导的贡献，声学支截止频率由大到小依次为：SiC（20THz）、Si（13THz）、GaN（7.1THz）、GaAs（6.2THz）。各模式的声子群速度 v_j 可由声子色散关系曲线得到（声子群速度详见补充材料 I）。下面展示金属 Al 和半导体（Si、SiC、GaAs、GaN）界面热导的计算过程。

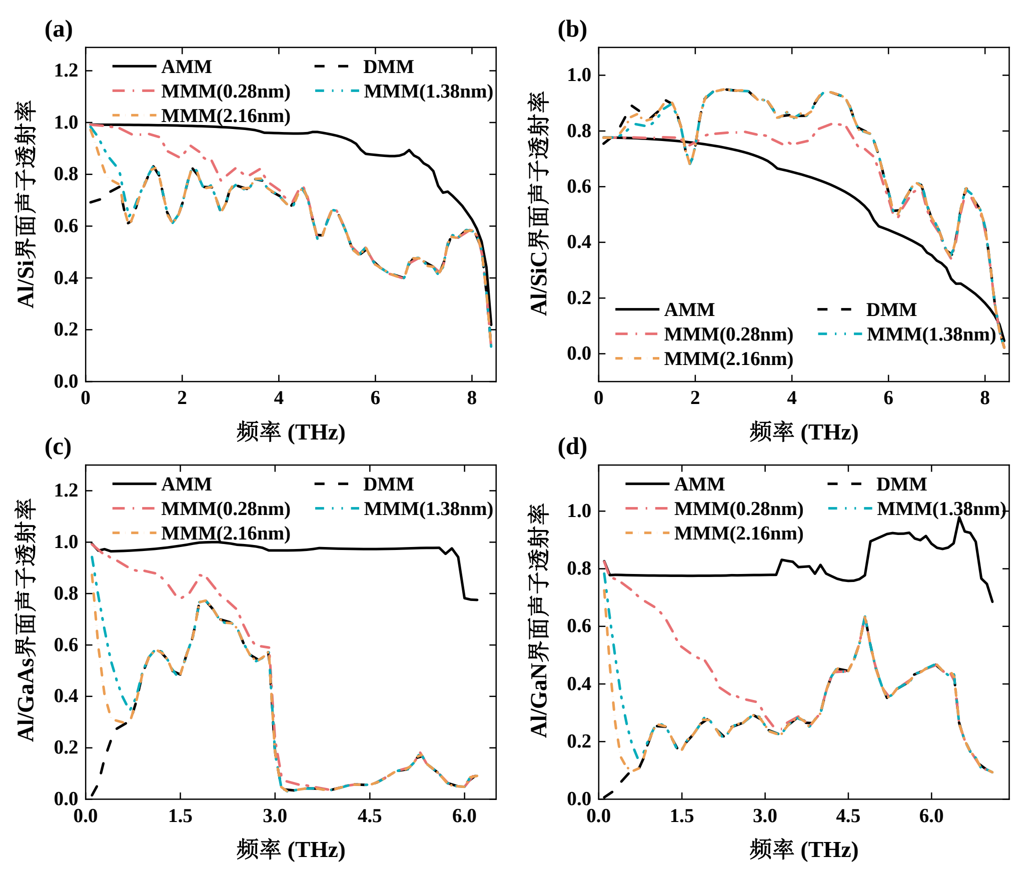


图 3　AMM、DMM 和 MMM（粗糙度：0.28nm、1.38nm、2.16nm）三种模型计算界面声子透射率频谱对比：（a）Al/Si 界面；（b）Al/SiC 界面；（c）Al/GaAs 界面；（d）Al/GaN 界面

Fig. 3.Comparison of phonon transmittance spectra calculated by AMM, DMM and MMM (roughness: 0.28nm, 1.38nm, 2.16nm):(a) Al/Si interface; (b) Al/SiC interface; (c) Al/GaAs interface; Al/GaN interface.

对于 Al 和半导体（Si、SiC、GaAs、GaN）可根据公式（2）至公式（5），分别计算 AMM、DMM 和 MMM（粗糙度：0.28nm、1.38nm、2.16nm）三种模型下的界面声子透射率频谱如图 3 所示，同样可以计算金属（Cu、Au）和半导体（Si、SiC、GaAs、GaN）界面的声子透射率频谱（详见补充材料 II）。对于 Al/Si、Al/GaAs 和 Al/GaN 界面，在大多数频率下 AMM 模型计算所得的界面声子透射率要高于 DMM 模型的计算结果。这是因为 AMM 假设入射界面处的声子通过镜面透射，不发生散射，因此透射概率由声学阻抗失配决定。相反，DMM 假设界面是完全无序的，所有声子都是扩散散射的。而对于 Al/SiC 界面，则是 DMM 计算结果更高，而对于 Al/SiC 界面两侧材料阻抗失配较大，此时 DMM 预测的结果大于 AMM 的结果[29]。

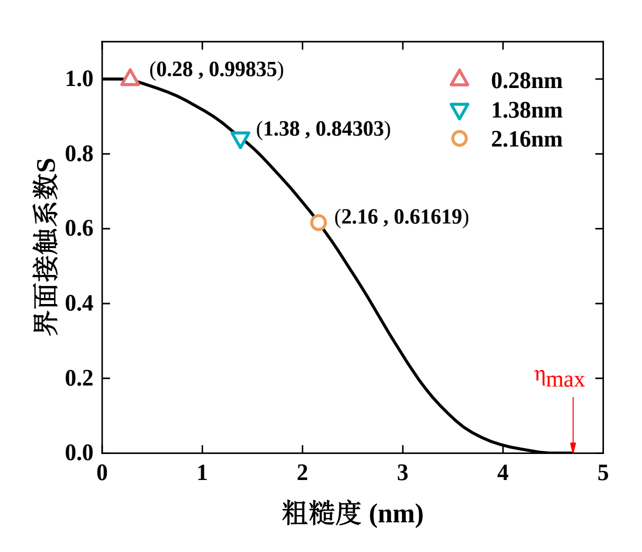


图 4　界面接触系数 S 和粗糙度之间的关系，其中 η_{max} 为界面两侧材料的原子间经验势函数截止半径，当界面粗糙度大于这个值时，认为界面接触系数趋近于 0，对于 Al/Si 界面，该值为 4.7nm

Fig. 4.The relationship between interface contact coefficient S and roughness, where η_{max} is the cutoff radius of the interatomic empirical potential function of the materials on both sides of the interface. When the roughness of the interface is greater than this value, the interface contact coefficient is considered to approach 0, which is 4.7nm for Al/Si interface.

将声子输运参数和声子透射率代入公式(1)中即可得到界面热导随温度变化的曲线。此外，在理论模型计算前，参考界面接触力学理论[39]，得到界面接触系数 S 与界面粗糙度的关系，如图 4 所示。其中，η_{max} 为界面两侧材料的原子间经验势函数截止半径，当界面粗糙度大于这个值时，认为界面接触系数趋近于 0，对于 Al/Si 界面，该值为 4.7nm

（其他界面的 $\eta_{\max}$ 详见补充材料 III），其他金属/半导体界面同样可采用上述方法得到界面接触系数 S 与界面粗糙度的关系。

将系数 S 代入公式(7)中即可计算不同温度、不同粗糙度下的理论模型结果，如图 5 所示。并与 Al/Si 界面实验测量值进行对比，得出结论：MMM 模型计算的界面热导值与实验测量值吻合度较高。

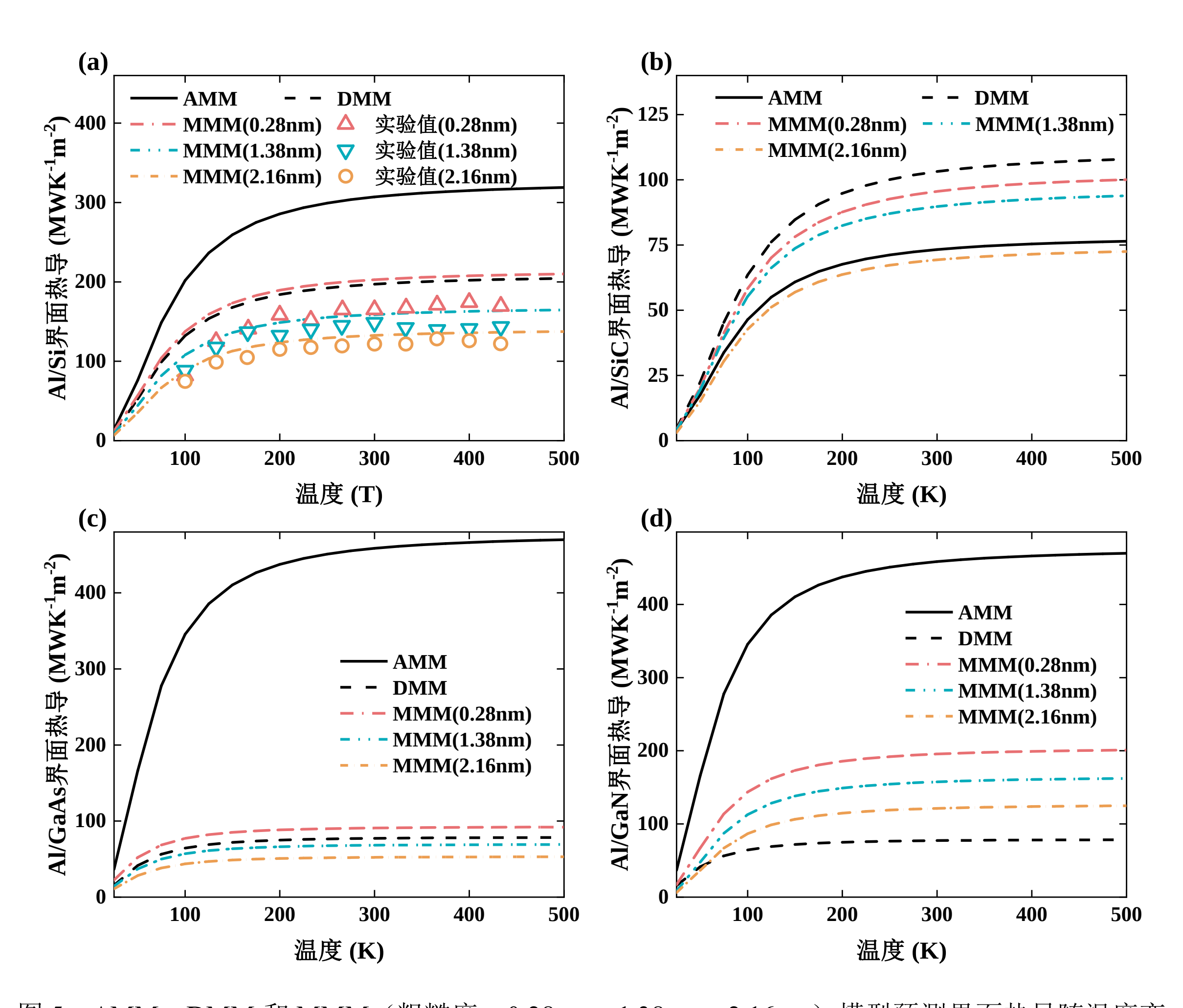


图 5　AMM、DMM 和 MMM（粗糙度：0.28nm、1.38nm、2.16nm）模型预测界面热导随温度变化关系曲线图：（a）Al/Si 界面；（b）Al/SiC 界面；（c）Al/GaAs 界面；（d）Al/GaN 界面；实验值来源于 Hopkins 等[15]人的测量

Fig. 5.Curves of interfacial thermal conductance predicted by AMM, DMM and MMM (roughness: 0.28nm, 0.53nm, 1.38nm) models as a function of temperature: (a) Al/Si interface, (b) Al/SiC interface, (c) Al/GaAs interface, (d) Al/GaN interface; The experimental values were obtained from measurements made by Hopkins[15] et al.

从图 5 可以看出，界面热导的大小随着温度升高逐渐趋于饱和。在此过程中，声子群速度、DOS 和界面透射率均保持不变。界面热导的变化的原因是玻色-爱因斯坦分布，

在低温条件下，只有低频声子对界面热导有贡献。因此，当温度升高时，更多频率较高的声子被激发参与界面热输运，从而增加了界面热导。当温度足够大时，激发的声子数饱和，温度的升高将不会再使更多的声子参与界面热输运。因此，界面热导会处于饱和状态。

对于其他金属（Cu、Au）和半导体（Si、SiC、GaAs、GaN）界面同样可根据上述流程计算界面热导随温度变化曲线（详见补充材料 IV），同时在理论模型计算时，采用了图 4 中同样方法得到不同界面的接触系数 *S*，以上界面热导在不同粗糙度下的计算结果如图 6 所示，从图中可以发现，对于金属/半导体界面，当粗糙度增大时，界面热导会减小，这与前人的研究结论一致[14, 15, 17, 28]。

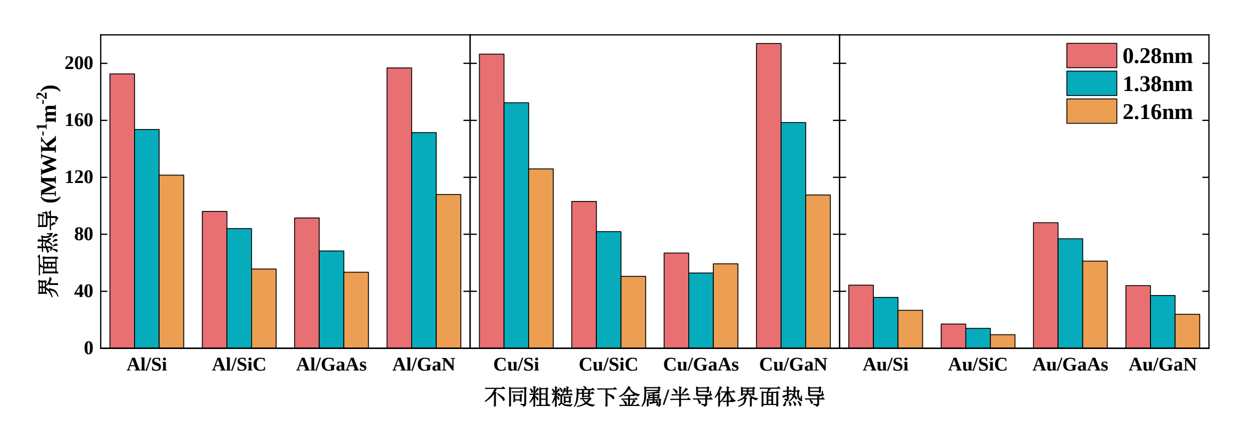


图 6　MMM 模型预测 300 K 时的金属（Al、Cu、Au）和半导体（Si、SiC、GaAs、GaN）界面热导，粗糙度取值：0.28nm、1.38nm、2.16nm

Fig. 6.Interfacial thermal conductance of metal (Al, Cu, Au) and semiconductor (Si, SiC, GaAs, GaN) interfaces predicted by MMM model at 300 K, roughness values: 0.28nm, 1.38nm, 2.16nm.

可以发现，Al/半导体界面和 Cu/半导体界面热导的预测结果十分相似，但与 Au/半导体界面相差较大。Al 和 Cu 声子色散关系和 DOS 极其相似，参与到界面热输运的声子频率近似，但金的声子色散关系截止频率低，使得只有较少的低频声子参与到界面热输运中。同时可以看出在金属/半导体界面中，Al、Cu 组成的金属/半导体界面热导要普遍更高，主要原因是相比 Au，金属（Al、Cu）声子色散关系截止频率较高，与半导体材料的 DOS 重合度高，同时对于声子色散关系截止频率较高的金属，如钼（Mo）[40]、

铬（Cr）[41]、镍（Ni）[42]也可得到较高的界面热导；而其他声子色散关系截止频率较低的金属，如铂（Pt）[42]、钌（Ru）[43]、钨（W）[44]只能得到相对较低的界面热导。

而从半导体的角度对比发现，在金属（Al、Cu）/半导体界面中，Si、GaN 组成的界面热导更高，而热导率较高的 SiC 在金属/半导体界面中界面热导偏低，主要是因为 SiC 的声学支截止频率远高于 Al、Cu，而 Si、GaN 的声学支截止频率与 Al、Cu 相对接近，DOS 重合度更大，界面热输运中有更多声子参与。声学支截止频率较低的半导体如氧化锌（ZnO）[45]、氧化镓（Ga_2O_3）[46]、磷化铟（InP）[47]则只能得到较低的界面热导。而对于 GaAs 而言，Au 的色散关系截止频率更加近似，DOS 重合度更高，因此 Au/GaAS 界面热导要大于 Au/半导体（Si、SiC、GaN）界面。

4　总结和展望

综上，本文通过考虑界面粗糙度和界面结构对金属/半导体界面热导的影响，提出预测界面热导的简化混合失配模型。通过将铝/硅界面的预测结果与实验测量结果进行比较，验证了简化混合失配模型的正确性。基于该模型，本文计算预测了金属（铝、铜、金）和半导体（硅、碳化硅、砷化镓、氮化镓）的界面热导，计算结果表明金属/半导体界面热导会随温度的升高而增大，但当温度较高时，界面热导增幅减缓。此外，充分考虑界面结构的计算结果表明界面热导会随粗糙度的增大而降低。简化混合失配模型具有使用简单、预测结果准确的特点，有利于对界面热导预测以及与实验测量结果进行对比和分析。

参考文献

[1] Wei N, Zhou C, Li Z, Ou B, Zhao K, Yu P, Li S, Zhao J 2022 *Mater. Today Commun.* **30** 103147

[2] Monachon C, Weber L, Dames C 2016 *Annu. Rev. Mater. Res., Vol 46* p433

[3] Cui Y, Li M, Hu Y 2020 *J. Mater. Chem. C* **8** 10568

[4] Deng S, Xiao C, Yuan J, Ma D, Li J, Yang N, He H 2019 *Appl. Phys. Lett.* **115** 101603

[5] Cahill D G, Braun P V, Chen G, Clarke D R, Fan S, Goodson K E, Keblinski P, King W P, Mahan G D, Majumdar A, Maris H J, Phillpot S R, Pop E, Shi L 2014 *Appl. Phys. Rev.* **1**

[6] Scott E A, Gaskins J T, King S W, Hopkins P E 2018 *APL Mater.* **6**

[7] Yang L, Wan X, Ma D, Jiang Y, Yang N 2021 *Phys. Rev. B* **103** 155305

[8] Liu B, Khvesyuk V I, Barinov A A, Wang M 2022 *Int. J. Mech. Sci.* **218** 106993

[9] Cahill D G, Braun P V, Chen G, Clarke D R, Fan S, Goodson K E, Keblinski P, King W P, Mahan G D, Majumdar A, Maris H J, Phillpot S R, Pop E, Shi L 2014 *Applied Physics Reviews* **1** 011305

[10] Yang N, Luo T, Esfarjani K, Henry A, Tian Z, Shiomi J, Chalopin Y, Li B, Chen G 2015 *J. Comput. Theor. Nanosci.* **12** 168

[11] Rustam S, Schram M, Lu Z, Chaka A M, Rosenthal W S, Pfaendtner J 2022 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **14** 32590

[12] Zhang P, Yuan P, Jiang X, Zhai S, Zeng J, Xian Y, Qin H, Yang D 2018 *Small* **14**

[13] Giri A, Hopkins P E 2019 *Adv. Funct. Mater.* **30**

[14] Duda J C, Hopkins P E 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 111602

[15] Hopkins P E, Duda J C, Petz C W, Floro J A 2011 *Phys. Rev. B* **84**

[16] Hopkins P E, Duda J C, Clark S P, Hains C P, Rotter T J, Phinney L M, Balakrishnan G 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98**

[17] Hopkins P E, Phinney L M, Serrano J R, Beechem T E 2010 *Phys. Rev. B* **82** 085307

[18] Lee E, Zhang T, Yoo T, Guo Z, Luo T 2016 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **8** 35505

[19] Park W, Sood A, Park J, Asheghi M, Sinclair R, Goodson K E 2017 *Nanoscale Microscale Thermophys. Eng.* **21** 134

[20] Liang Y, Zhang B, Liu Z, Liu W 2021 *Int. J. Heat Mass Transfer* **174**

[21] Xu Y, Kato R, Goto M 2010 *J. Appl. Phys.* **108**

[22] Nylander A, Hansson J, Nilsson T, Ye L, Fu Y, Liu J 2021 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13** 30992

[23] Zhang Y, Ma D, Zang Y, Wang X, Yang N 2018 *Front. Energy Res.* **6**

[24] Monachon C, Weber L, Dames C 2016 *Annu. Rev. Mater. Res.* **46** 433

[25] Singh P, Seong M, Sinha S 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102**

[26] Hamaoui G, Horny N, Hua Z, Zhu T, Robillard J F, Fleming A, Ban H, Chirtoc M 2018 *Sci Rep* **8** 11352

[27] Giri A, Gaskins J T, Donovan B F, Szwejkowski C, Warzoha R J, Rodriguez M A, Ihlefeld J, Hopkins P E 2015 *J. Appl. Phys.* **117**

[28] Chen J, Xu X, Zhou J, Li B 2022 *Rev. Mod. Phys.* **94** 025002

[29] Swartz E T, Pohl R O 1989 *Rev. Mod. Phys.* **61** 605

[30] Kazan M, Bruyant A, Royer P, Masri P 2010 *Surf. Sci. Rep.* **65** 111

[31] De Bellis L, Phelan P E, Prasher R S 2000 *J. Thermophys. Heat Transfer* **14** 144

[32] Ziman J M 1960 Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids (Oxford University Press)

[33] Gale J D, Rohl A L 2003 *Mol. Simul.* **29** 291

[34] Mei J, Davenport J W 1992 *Phys. Rev. B* **46** 21

[35] Foiles S M, Baskes M I, Daw M S 1986 *Phys. Rev. B* **33** 7983

[36] Johnson R A 1989 *Phys. Rev. B* **39** 12554

[37] Stillinger F H, Weber T A 1985 *Phys. Rev. B* **31** 5262

[38] Tersoff J 1988 *Phys. Rev. B* **38** 9902

[39] Mulakaluri N, Persson B N J 2011 *EPL* **96**

[40] Farber D L, Krisch M, Antonangeli D, Beraud A, Badro J, Occelli F, Orlikowski D 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 115502

[41] Trampenau J, Petry W, Herzig C 1993 *Phys. Rev. B* **47** 3132

[42] Dal Corso A 2013 *J. Phys.: Condens. Matter* **25** 145401

[43] Koh Y R, Shi J, Wang B, Hu R, Ahmad H, Kerdsongpanya S, Milosevic E, Doolittle W A, Gall D, Tian Z, Graham S, Hopkins P E 2020 *Phys. Rev. B* **102**

[44] Debernardi A, Alouani M, Dreyssé H 2001 *Phys. Rev. B* **63** 064305

[45] Serrano J, Manjón F J, Romero A H, Ivanov A, Cardona M, Lauck R, Bosak A, Krisch M 2010 *Phys. Rev. B* **81**

[46] Ghosh K, Singisetti U 2016 *Appl. Phys. Lett.* **109**

[47] Fritsch J, Pavone P, Schroder U 1995 *Phys. Rev. B* 52 11326

Mixed mismatch model in predicting the interfacial thermal conductance of metal/semiconductor interface

Zong Zhi-Cheng[1)] Pan Dong-Kai[1)] Deng Shi-Chen[1)] Wan Xiao[1)] Yang Li-Na[2)]

Ma Deng-Ke[3)] Yang Nuo[1)] †

1) (School of Energy and Power Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

2) (School of Aerospace Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

3) (School of Physics and Technology, Nanjing Normal University, Nanjing 210000, China)

Abstract

The acoustic mismatch model and diffuse mismatch model are widely used in the calculation of interfacial thermal conductance. These two models are respectively based on the assumption of extremely smooth and rough interfaces. Due to the great difference between the actual interface structure and the two hypotheses, the prediction of these two models deviate greatly from the actual interfacial thermal conductance. The recently proposed mixed mismatch model considers the effect of interface structure on the ratio of phonon specular transmission to diffuse scattering transmission, and the prediction accuracy is improved. However, this model requires molecular dynamics simulation to obtain phonon information at the interface. In this paper, the mixed mismatch model is simplified by introducing the measured roughness value, and the influence of interface structure on the contact area is taken into account to achieve a simple, fast and accurate prediction of interface thermal conductance.

Based on this model, the interfacial thermal conductance of metals (aluminum, copper, gold) and semiconductors (silicon, silicon carbide, gallium arsenide, gallium nitride) are calculated and predicted. The results of Al/Si interface are in good agreement with the experimental results. This model is not only helpful to understand the mechanism of interface heat conduction, but also helpful to compare with the measurement results.

Keywords： interfacial thermal conductance, interfacial thermal resistance, metal/semiconductor interface, acoustic mismatch model, diffuse mismatch model

PACS： 63.20.D-, 63.20.kg, 68.35.-p, 44.10.+i

† Corresponding author. E-mail: nuo@hust.edu.cn